

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ІНФОРМАТИКА, МАТЕМАТИКА,
АВТОМАТИКА

ІМА :: 2016

**МАТЕРІАЛИ
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 18–22 квітня 2016 року)



Суми
Сумський державний університет
2016

**Комп'ютерне моделювання ультратонкої плівки рідкого аргону,
затиснутої між алмазними пластинами**

Хоменко О.В., *професор*; Бойко Д.В., *студент*;
Захаров М.В., *студент*; Хоменко К.П., *асистент*
Сумський державний університет, м. Суми

Тертя є однією з найдавніших проблем у фізиці із величезною практичною значущістю. З трибології – науки про тертя – відомо, що між поверхнями контактуючих твердих тіл майже завжди знаходиться плівка, яка утворена різноманітними речовинами. Сила тертя визначається силою, необхідною для зсуву цієї плівки. Також для багатьох застосувань велику роль грає режим межового тертя, коли між пластинами, що ковзають, знаходиться молекулярно-тонкий шар мастила. Наведені вище факти мотивували проведення досліджень, описуваних у даній роботі. Вивчалися властивості ультратонкої плівки аргону, яка складається із одного або двох шарів молекул й обмежена двома кристалічними алмазними поверхнями. Вибір аргону в якості рідини для моделювання обумовлений його важливістю, повсюдністю, й унікальними, зокрема трибологічними властивостями. Останні досі ще не мають задовільного пояснення. Вони визначаються властивостями як поверхонь, так і молекул рідини, і необхідним є пошук моделі, яка максимально відтворює незвичайну поведінку аргону. За мету досліджень ставилася перевірка коректності використання абсолютно жорстких гладеньких поверхонь й однієї з наявних моделей молекули аргону для симуляції трибологічних явищ. Вперше проведено комп'ютерні експерименти для моделі молекул аргону із застосуванням методу молекулярної динаміки. Вивчено поведінку рівноважних й динамічних характеристик системи. Показано, що при збільшенні зовнішнього навантаження відбувається перехід плівки до твердоподібного стану, на що вказує зменшення величини коефіцієнта дифузії та збільшення зсувної в'язкості. Виявлена організація молекул у шари і відсутність їх площинного впорядкування внаслідок використання неструктурованих поверхонь. Також отримані залежності кінетичної сили тертя від часу та навантаження й обчислені значення коефіцієнта тертя. Зроблено висновки про реалістичність досліджуваної моделі.